

Chapitre 3 : Outils d'analyse de procédés et indicateurs de durabilité

III.1 Les outils de la chimie verte

III.1.1. Rendement d'une réaction chimique

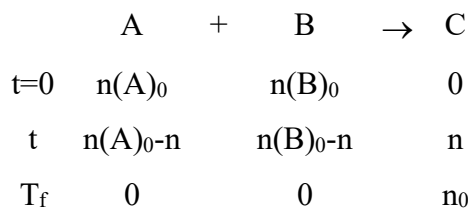
Le rendement η d'une réaction chimique est défini comme le rapport entre le nombre de mole de produit n_p obtenu expérimentalement et le nombre de mole maximal $n_{P(max)}$ que l'on pourrait obtenir si la réaction était totale.

$$\eta = \frac{n_p}{n_{P(max)}}$$

Le rendement R peut également s'exprimer comme le rapport entre la masse de produit m_p obtenue expérimentalement et la masse de produit théoriquement attendue $m_{P(Th)}$ si la réaction était totale.

$$\eta = \frac{m_p}{m_{P(Th)}}$$

Exemple :



$$\eta = \frac{n}{n_0}$$

Si A est le réactif limitant : $\frac{n(A)}{v_A} < \frac{n(B)}{v_B}$ et $\eta = \frac{n(C)/v_C}{n(A)/v_A} = \frac{v_A n(C)}{v_C n(A)}$

III.1.2 Le facteur d'économie d'atomes (E_{At})

On appelle le facteur économie d'atomes, la grandeur définie comme le rapport pondéré de la masse du produit sur la somme des masses des réactifs :

$$E_{At} = \frac{\text{masse du produit désiré}}{\text{somme des masses des réactifs}} = \frac{m(\text{produit désiré})}{\sum m(\text{Réactifs})}$$

Soit la réaction chimique : $a A + b B \rightarrow p P + d D$

$$E_{At} = \frac{m_p}{m_A + m_B} = \frac{p \cdot M_P}{a \cdot M_A + b \cdot M_B}$$

III.1.3 Le facteur environnemental ou bien économie de matière (E)

Le facteur environnemental (E) introduit par Roger Sheldon est défini comme le rapport de la masse totale de déchets sur la masse du produit :

$$E = \frac{\text{masse totale des déchets}}{\text{masse du produit}}$$
$$E = \frac{m_D}{m_P} = \frac{dM_D}{pM_P} = \frac{m_A + m_B - m_P}{m_P} = \frac{aM_A + bM_B - pM_P}{pM_P}$$

Le facteur environnemental E met en évidence l'importance de la masse de déchets générés lors d'une synthèse. Sa valeur idéale est la plus faible possible, en tendant vers zéro.

Relation entre le facteur E et le facteur E_{At} :

$$E = \frac{a \cdot M_A + b \cdot M_B - p \cdot M_P}{p \cdot M_P} = \frac{1 - \frac{p \cdot M_P}{a \cdot M_A + b \cdot M_B}}{\frac{p \cdot M_P}{a \cdot M_A + b \cdot M_B}} = \frac{1 - E_{At}}{E_{At}}$$

$$E = \frac{1 - E_{At}}{E_{At}} \Rightarrow E_{At} = \frac{1}{1 + E}$$

III.1.4 Le facteur d'économie de carbone, (E_C)

Le facteur d'économie de carbone est le rapport pondéré du nombre d'atomes de carbone du produit sur celui des réactifs.

$$E_C = \frac{p N_C(P)}{a N_C(A) + b N_C(B)}$$

$E_C = 1$ met en évidence l'inclusion de tous les atomes de carbone des réactifs dans le produit.

III.1.5 L'intensité massique

L'intensité massique est le rapport de la masse totale des entrants sur la masse du produit désiré.

$$IM = \frac{\text{masse totale des entrants}}{\text{masse du produit désiré}}$$

Avec : masse des entrants = masse des sortants = masse de produit désiré + masse des déchets

Masse des entrants = masse des réactifs + masse des auxiliaires

$$IM = \frac{\text{masse de produit désiré} + \text{masse des déchets}}{\text{masse du produit désiré}} = 1 + \frac{\text{masse des déchets}}{\text{masse du produit désiré}} = 1 + E$$

$$IM = 1 + E$$

III.1.6 Efficacité Massique de Réaction (EMR)

L'Efficacité Massique de Réaction (RME , *Reaction Mass Efficiency*) est le rapport de la masse du produit obtenu sur la masse de réactifs introduits :

$$EMR = \frac{\text{masse du produit}}{\text{masse des réactifs}} = \frac{m_P}{m_A + m_B} = \frac{n_P M_P}{n_A M_A + n_B M_B}$$

Si nous sommes en proportions stœchiométrique : $\frac{n_A}{a} = \frac{n_B}{b} = \frac{n_P}{p}$

$$EMR = \frac{n_P}{n_A} \frac{M_P}{M_A + \frac{n_B}{n_A} M_B} = \frac{n_P}{n_A} \frac{M_P}{M_A + \frac{b}{a} M_B}$$

Avec $\eta = \frac{a n_P}{p n_A} \Rightarrow \frac{n_P}{n_A} = \frac{p}{a} \eta$

$$EMR = \eta \frac{p}{a} \frac{M_P}{M_A + \frac{b}{a} M_B} = \eta \frac{p M_P}{a M_A + b M_B} = \eta E_{At}$$

Masse des entrants = masse des réactifs + masse des auxiliaires = masse des réactifs + S

Les auxiliaires sont les solvants utilisés, les catalyseurs et tout autre produit utilisé.

S= masse des auxiliaires

$$IM = \frac{\text{masse totale des entrants}}{\text{masse du produit}} = \frac{\text{masse des réactifs} + S}{\text{masse du produit}} = \frac{\text{masse des réactifs}}{\text{masse du produit}} + \frac{S}{\text{masse du produit}}$$

$$IM = \frac{1}{EMR} + \frac{S}{\text{masse du produit}} \text{ implique } IM = \frac{n_A M_A + n_B M_B + S}{\eta n_A \frac{p}{a} M_P}$$

Avec : $\eta = \frac{a n_P}{p n_A} \Rightarrow n_P = \eta n_A \frac{p}{a}$

Si on introduit le rapport stœchiométrique φ , défini comme suit : $\varphi = \frac{n_B}{n_A} / \frac{b}{a}$

Et si le réactif B utilisé en excès, cela signifie que $\varphi > 1$, implique :

$$IM = \frac{n_A M_A + \varphi n_A \frac{b}{a} M_B + S}{\eta n_A \frac{p}{a} M_P} = \frac{\frac{n_A}{a} (a M_A + \varphi b M_B) + S}{\eta n_A \frac{p}{a} M_P}$$

En divisant chaque terme par : $\frac{n_A}{a} (a M_A + \varphi b M_B)$ on aura :

$$IM = \frac{1 + \frac{S}{\frac{n_A}{a} (a M_A + \varphi b M_B)}}{\frac{\eta n_A \frac{p}{a} M_P}{\frac{n_A}{a} (a M_A + \varphi b M_B)}} = \frac{1 + b' + s'}{\eta E_{AT}}$$

Où : $b' = \frac{(\varphi - 1) b M_B}{a M_A + b M_B} = \frac{\text{masse de l'excès de B}}{\text{masse des réactifs pris en quantité stœchiométriques}}$

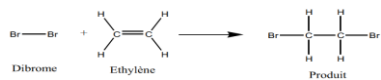
$$s' = \frac{S}{\frac{n_A}{a} (a M_A + \varphi b M_B)} = \frac{\text{masse des auxiliaires}}{\text{masse des réactifs pris en quantité stœchiométriques}}$$

$$E_{At} = \frac{p M_P}{a M_A + b M_B}$$

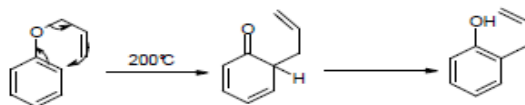
Si $S'=0$ implique $IM = \frac{1+b'}{\eta E_{AT}}$ implique $EMR = \frac{\eta E_{AT}}{1+b'}$ car $IM = \frac{1}{EMR}$

Exemples de réaction dont $E_{At}=1$

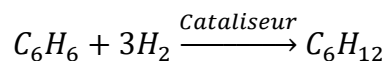
1/ Réaction d'addition électrophile :



2/ Réaction de réarrangement de Claisen :

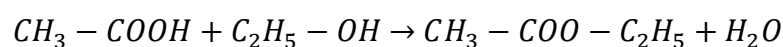


3/ Réaction catalytique (hydrogénation de benzène)



Exemples de réaction dont $E_{At} < 1$

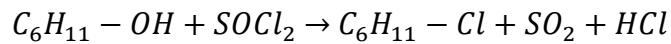
1/ Réaction d'estérification acide éthanoïque / éthanol



$$E_{At} = \frac{m_P}{m_A + m_B} = \frac{p \cdot M_P}{a \cdot M_A + b \cdot M_B} = \frac{88}{60 + 46} = 0.83$$

$$E_C = \frac{N_{CP}}{N_{CAC} + N_{CAL}} = \frac{4}{2 + 2} = 1$$

2/ Réaction de substitution



$$E_{At} = \frac{m_P}{m_A + m_B} = \frac{p \cdot M_P}{a \cdot M_A + b \cdot M_B} = \frac{120.5}{102 + 119} = 0.545$$

$$E = \frac{m_A + m_B - m_P}{m_P} = \frac{a \cdot M_A + b \cdot M_B - p \cdot M_P}{p \cdot M_P} = \frac{102 + 119 - 120.5}{120.5} = 0.83$$

$$E = \frac{m_D}{m_P} = \frac{m_{SO_2} + m_{HCl}}{m_P} = \frac{M_{SO_2} + M_{HCl}}{M_P} = \frac{64 + 36.5}{120.5} = 0.83$$

$$E = \frac{1 + E_{At}}{E_{At}} = \frac{1 - 0.545}{0.545} = 0.83$$

III.2 Concept de produit utile et application pour une chimie verte

III.2.1 Définition du produit utile

Le produit utile est la substance recherchée ou cible d'une réaction chimique, celle qui possède une valeur économique ou fonctionnelle.

Dans une réaction chimique on distingue généralement :

- **Réactifs** : substances de départ
- **Produit utile** : produit principal désiré
- **Sous-produits** : produits secondaires
- **Déchets** : substances non valorisées

Objectif en chimie durable

Maximiser la formation du **produit utile** et minimiser les **déchets**.

III.2.2 Lien avec la chimie verte

La **chimie verte** vise à concevoir des procédés chimiques qui :

- réduisent la pollution
- économisent les ressources naturelles
- limitent la production de déchets
- diminuent la consommation d'énergie

Le produit utile est un **indicateur important de l'efficacité d'un procédé chimique**.

III.2.3 Indicateurs liés au produit utile

1/ Rendement chimique

Le rendement indique la quantité de produit utile réellement obtenue.

Un rendement élevé signifie une **bonne efficacité de réaction**.

2/ Économie d'atomes

Elle mesure la proportion des atomes des réactifs qui se retrouvent dans le produit utile.

Maximiser l'intégration des atomes dans le produit utile.

III.2.4 Application dans l'industrie chimique

Le concept de produit utile est utilisé pour :

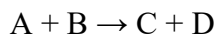
- optimiser les procédés de synthèse
- réduire les coûts de production
- diminuer la quantité de déchets industriels
- améliorer la sécurité des procédés chimiques

Secteurs concernés :

- industrie pharmaceutique
- industrie agrochimique
- production de polymères
- chimie fine

Exemple simple

Réaction chimique :



- **C** = produit utile
- **D** = sous-produit

En chimie verte, on cherche à :

- augmenter la formation de **C**
- réduire la formation de **D**
- améliorer l'économie d'atomes

III.2.5 Importance pour l'environnement

L'optimisation du produit utile permet :

- moins de déchets chimiques
- moins de consommation de matières premières
- moins d'énergie utilisée
- réduction de la pollution

En conclusion : Le concept de **produit utile** est essentiel pour concevoir des **procédés chimiques plus efficaces et plus respectueux de l'environnement.**

Il constitue un outil important pour appliquer les principes de la **chimie verte.**